

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ДИФФУЗИИ Xe В UO₂

Шекунов Г.С., Некрасов К.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: grishechka1997@gmail.com

GRAIN BOUNDARY DIFFUSION SIMULATION OF Xe IN UO₂

Shekunov G.S., Nekrasov K.A.

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

Annotation. A model of UO₂ crystalline based on CSL theory with different grain boundary $\Sigma 5$, $\Sigma 13$, $\Sigma 19$ and screw $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$ and edge dislocations $[1\ 0\ 0]$, $[1\ 1\ 0]$ and $[1\ 1\ 1]$ is suggested. Diffusion coefficient and activation energy of Xe is obtained.

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование диффузии ксенона вдоль дислокаций и границ зёрен в кристалле UO₂. Рассмотрены краевые и винтовые дислокации с векторами Бюргерса $[100]$, $[110]$, $[111]$. Границы зёрен характеризовались разориентациями кристаллографических плоскостей $\Sigma 5$, $\Sigma 13$ и $\Sigma 19$. Для создания модельных границ зерна использовали методику совпадающих узлов решётки [1, 2]. Взаимодействие частиц описывали парными потенциалами [3, 4]. Необходимую производительность вычислений обеспечивали распараллеливанием критичных расчётов на графических процессорах.

В результате моделирования получены зависимости коэффициентов диффузии ксенона в диапазоне температур от 2000 К до 3000 К, определены соответствующие энергии активации диффузии.

1. Galvin C., Cooper M., Fossati P., Stanek P., Grimes R., Andersson. J., Phys.: Condensed matter, 28, 405002 (2016).
2. Arima T., Yoshida K., Idemitsu K., Inagaki Y., Sato I., Material science and engineering 9, 012003 (2010).
3. Поташников С.И., Боярченков А.С., Некрасов К.А., Купряжкин А.Я., Альтернативная энергетика и экология, 8, (2007).
4. Seitov D.D., Nekrasov K.A., Kupryazhkin A.Ya., Gupta S.K., Akilbekov A.T., AIP Conference Proceedings 1886, 020018 (2017).